

文章编号: 0253-2239(2006)05-0787-5

基于模拟退火算法的宽角度 X 射线超反射镜 设计研究*

程鑫彬 王占山 张 众 王凤丽 王洪昌 陈玲燕

(同济大学精密光学工程技术研究所 物理系, 上海 200092)

摘要: 应用于硬 X 射线波段的宽带多层膜光学元件——宽角度 X 射线超反射镜的设计可以归结为一个连续变量的多维多极值的全局优化问题。缺少一种有效的全局优化方法是阻碍解决这一难题的一个关键。模拟退火算法是一种简单而且通用的全局优化算法。结合光学多层膜的设计原理提出了利用模拟退火算法来进行宽角度 X 射线超反射镜设计的新方法。结合已有的方法选择了 W 和 C 作为膜层的膜对材料,设计出 Cu 的 $K\alpha$ 线处角度范围 $0.9^\circ \sim 1.1^\circ$ 反射率达到 20% 的宽角度 X 射线超反射镜。并在此基础上采用改进的自适应模拟退火算法实现了 Cu 的 $K\alpha$ 线处宽角度 X 射线超反射镜的理想设计结果。设计结果表明了模拟退火算法在多层膜最优化设计领域的正确性和有效性。

关键词: 薄膜光学; X 射线超反射镜; 模拟退火算法

中图分类号: O484.4 文献标识码: A

Wide-Angle X-Ray Supermirror Design Using Simulated Annealing Algorithm

Cheng Xinbin Wang Zhanshan Zhang Zhong Wang Fengli

Wang Hongchang Chen Lingyan

(*Institute of Precision Optical Engineering, Department of Physics, Tongji University, Shanghai 200092*)

Abstract: The design of wide angle X-ray supermirror, wide band-pass multilayer optical elements operating in the hard X-ray region is attributed to the global optimization of the multi-dimensional extremum of continuous variables. Lack of powerful optimization method is the key obstacle to this problem. Simulated annealing algorithm is a simple and universal global optimization method. Based on the theory of optical multilayers, a new method of designing wide angle X-ray supermirror using simulated annealing algorithm is presented. The coating materials pair W/C is selected by the combination of the Spiller' and Yamamoto' criterions. The designed supermirror with high and flat reflectivity of 20%, over a grazing incident angle range $0.9^\circ \sim 1.1^\circ$ at the wavelength of Cu $K\alpha$ line is completed. Furthermore, the improved adaptive simulated annealing algorithm is used to obtain a better design result. The validity of the proposed algorithm is shown by the example involving multilayer design.

Key words: thin film optics; X-ray supermirror; simulated annealing algorithm

1 引 言

第三代同步辐射光源的出现和发展,为硬 X 射线应用研究提供了新的机遇。在材料的微结构检测^[1],高压条件下材料性质的研究和医用成像领域^[2],X 射线技术得到了广泛的应用。在这些应用

中,需要采用宽带多层膜反射镜将同步辐射光束传递到样品上。同时,宽带多层膜可提高掠入射式 X 射线天文望远镜的掠入射角,增大接受面积,提高成像的分辨率,可以扩展成像的能量范围,实现能量高达 100 keV 的 X 射线的成像,因此可以用它来观察

* 国家自然科学基金(60178021)资助课题。

作者简介:程鑫彬(1980~),男,山东胶州人,同济大学物理系博士研究生,主要从事 X 射线波段薄膜光学研究。

E-mail: cxbbin@yahoo.com.cn

收稿日期:2005-05-27;收到修改稿日期:2005-10-10

星系和超新星的 X 射线图像。

扩展多层膜带宽最直接的方法就是设计出周期结构不同的 X 射线多层膜。从不同角度(或是不同波长)入射的 X 射线将在每一层获得不同的反射,经过每一层的叠加和补偿获得较大范围内一致的反射率。这种非周期的多层膜最早应用于中子光学,人们把它叫做超反射镜,后来它又在 X 射线天文观察和同步辐射中得到应用。

已知多层膜的膜系结构,计算多层膜的反射率曲线是很容易的,我们称之为正向的问题;根据特殊要求的反射率曲线来设计多层膜的膜系结构是比较困难的,我们称之为逆向的问题。宽带多层膜反射镜的设计方法基本上有两种:一种是基于半经验近似公式的解析方法^[3],另一种是基于计算机的全数值计算的方法^[4,5]。前者的缺点是:需要设计者对膜层的特点以及 X 射线与物质的相互作用有深刻的认识,并拥有丰富的经验,初学者不易掌握,而且通用性也不够好。目前已经有人应用随机搜索方法和单纯形方法来优化设计膜系结构并取得较好的结果。但这两种方法都是局部优化算法,一般找不到全局最优值。模拟退火算法^[6]源于固体的退火过程,它与普通算法的本质区别在于:在温度参量 t 的控制下,除了接受优化解之外还根据麦特ropolis (Metropolis) 准则以一定的概率接受恶化解。这使得模拟退火算法既具有局部寻优的能力,又具有从局部最优“陷阱”中跳出的能力。因此,它是一种全局优化算法。本文致力于将模拟退火法应用于连续函数(X 射线超反射镜的评价函数)的全局优化这一逆向设计问题。介绍了 X 射线多层膜的设计原理,包括多层膜膜对材料的选择规则,以及计算多层膜反射率的模型;介绍模拟退火算法的基本思想以及相关参量的选取规则;给出了宽角度 X 射线超反射镜的设计结果以及分析和讨论。

2 X 射线超反射镜设计原理

在多层膜设计中,首先考虑的是组成多层膜的膜层材料对的选取。Spiller 和 Yamamoto 等^[7,8]提出选择多层膜材料的光学原则是:两种材料间具有最高的光学衬比度和最低的吸收损失。在硬 X 射线波段 Cu 的 $K\alpha$ 线处($\lambda = 0.154 \text{ nm}$),根据不同材料的光学性能、成膜特性以及实验室的实际条件,本文所选用的膜层材料对是 W 和 C^[9]。

对于具有固定周期的多层膜,其峰值反射率随多层膜的周期数 N 的增大而增加。但是由于材料

的吸收作用,随着 N 值的增加,峰值反射率 $R_\lambda(\theta, d)$ 将趋向饱和。膜对数过多的多层膜不仅无法继续提高峰值反射率 $R_\lambda(\theta, d)$,而且给数值计算和实际制备带来了很大麻烦^[10]。因此,选择合适的多层膜膜对对超反射镜的理论设计与实验制备都有重要的影响。在 Cu 的 $K\alpha$ 线处,掠入射角度在 $0.9^\circ \sim 1.1^\circ$ 之间时,理论计算的结果显示当多层膜有 20 个膜对时,反射率已达到饱和。因此,本文选用了 20 个膜对的多层膜进行优化^[11],被优化的函数是一个包含 40 个独立变量的复杂函数。优化设计的目标是在掠入射角($0.9^\circ \sim 1.1^\circ$)之间获得一致的 20% 的反射率,而在($0.8^\circ \sim 0.9^\circ$)和($1.1^\circ \sim 1.2^\circ$)之间获得一致的接近于零的反射率。把这三个区间各分成 N 个点,计算出每个点的反射率 $R_\lambda(\theta_k, d)$ ($1 \leq k \leq N$),令评价函数(merit function, MF)

$$f_{\text{MF}} = \int_{0.8^\circ}^{0.9^\circ} R(\theta)^2 d\theta + \int_{0.9^\circ}^{1.1^\circ} [0.2 - R(\theta)]^2 d\theta + \int_{1.1^\circ}^{1.2^\circ} R(\theta)^2 d\theta,$$

f_{MF} 是宽角度 X 射线超反射镜设计评价函数。把提高宽角度 X 超反射镜的性能的问题归结为一个连续变量的多维多极值的函数 f_{MF} 的全局优化问题。模拟退火算法就是通过不断改变 n 维向量中各个膜层的厚度 d ,通过 f_{MF} 的变化实现超反射镜结构的优化。

3 模拟退火算法实现过程

1982 年, Kirkpatrick 首先意识到固体退火过程与最优化问题之间存在着类似性,应该把麦特ropolis 准则引入到优化过程中来,最终得到一种对麦特ropolis 算法进行迭代的组合优化算法,这种算法模拟固体退火过程,被称为模拟退火算法(Simulated annealing algorithm, SA 算法)。设最优化问题的一个解 $W = [w_1, w_2, \dots, w_n]^T$ 及其目标函数 $f(W)$ 分别与固体的一个微观状态 i 及其能量 E_i 等价,随算法递减其值的控制参量 t 担当退火过程中的温度 T 的角色,通过对固体退火过程的模拟,求出全局最小值。

模拟退火算法的实现过程:

1) 设定初始温度 T_{max} ,每一温度下的迭代次数马尔可夫链的长度 $L_{\text{max}} = 200n$, n 为被优化问题的变量个数,温度衰减函数 $T_{k+1} = \alpha T_k$,一般 α 取 0.95 左右;

2) 随机产生一个初始解 $W^x = [\omega_1^x, \omega_2^x, \dots, \omega_n^x] \in [W^{\min}, W^{\max}]$, 计算评价函数 $f_x = f(W^x)$;

3) 判断是否满足终止条件, 若满足, 则结束; 否则, $T_{K+1} = \alpha T_K, L=1$, 转 4);

4) 利用新解发生器产生一个新解 $W^y = [\omega_1^y, \omega_2^y, \dots, \omega_n^y] \in [W^{\min}, W^{\max}]$ 。可以用如下的办法产生新的构形:

$$\omega_i^y = \omega_i + r_i \times \delta \times (W^{\min} - W^{\max}), \quad 1 \leq i \leq n,$$

δ 是步长变化因子, r_i 是 $[-1, 1]$ 之间的均匀随机数, 并计算评价函数 $f_y = f(W^y)$;

5) 根据麦绰珀里斯准则在温度 T 下的转移概率

$$P_{xy} = \begin{cases} 1, & f_y \leq f_x \\ \exp\left(\frac{f_i - f_x}{KT}\right), & f_y > f_x \end{cases}$$

当该转移概率 $P_{xy} > \text{random}[0, 1]$ 时, 接受这个新的解, 否则拒绝;

6) 若满足 $L > L_{\max}$, 转到 3), 否则 $L = L + 1$ 转到 4)。

模拟退火算法的流程图如图 1 所示。由模拟退火算法的描述可知要把模拟退火算法应用到具体问题, 须先确定如下参量: 温度 t 的初始值 t_0 ; 停止准则; 降温系数 α ; 每一温度下马尔可夫链的长度 L_{\max} 。

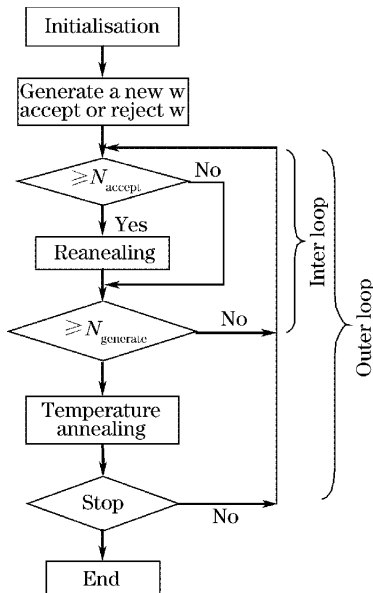


图 1 模拟退火算法流程图

Fig. 1 Flow chart of the simulated annealing

4 应用模拟退火算法设计宽角度 X 射线超反射镜

模拟退火算法允许任意初始序列和随机数, 使

得优化过程的前期工作大大减少。应用上述模拟退火算法来解决这一设计难题, 确定下述基本参量后编写 FORTRAN 计算程序就可以在计算机上进行模拟运算。

1) $T_{\max} = 10 \text{ }^\circ\text{C}, T_{K+1} = 0.98T_K$;

2) 随机给定 20 个膜对 40 个膜层的厚度 $W^0 = [\omega_1^0, \omega_2^0, \dots, \omega_{40}^0], \omega_i^0 \in [2 \text{ nm}, 50 \text{ nm}], L_{\max} = 8000$;

3) 将掠入射角 $0.8^\circ \sim 1.2^\circ$ 之间均分成 600 个点, 计算评价函数 f_{MF} 产生新解, 进行优化。

4) 终止温度 $T_{\min} = 0.001 \text{ }^\circ\text{C}$; 在一个马尔可夫链内解的质量没有提高就终止迭代计算; 评价函数的初始值 33.35, 被优化后评价函数的最终输出解为 2.65, 见表 1。记录下此时的各个膜层的厚度, 计算得到这种多层膜结构的反射率曲线, 如图 2 所示。

表 1 模拟退火算法的计算结果

Table 1 Calculation results using SA algorithm

CPU time	Average reflectivity	Final f_{MF}	Standard Deviation
12 h	0.157	2.65	1.63

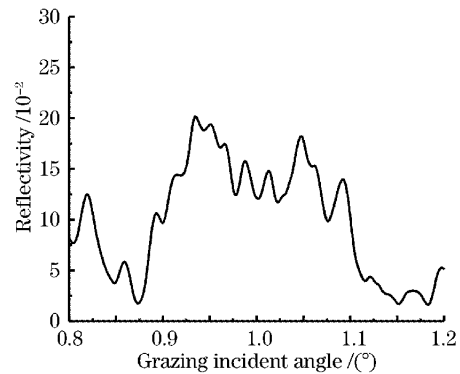


图 2 反射率与掠入射角度的曲线图

Fig. 2 Reflectivity profile versus the grazing incident angle

从图 2 可以看出模拟退火算法虽然起到了一定的优化作用, 但是明显没有找到全局最优解。这是由于数学上对马尔可夫链渐进收敛性的证明显示, 模拟退火算法需要趋近无限的变换才能任意地逼近全局最优解, 但对于大多数优化问题它是一种指数时间算法, 无法应用于实际。在实际应用中, 人们采用了有限下降时间的有限马尔可夫链序列去逼近模拟退火算法的渐进形态。这当然是以牺牲得到最优解的保证为代价的。因此, 人们研究模拟退火算法的核心就是针对具体问题时怎样提高算法的效率, 使算法在合理的计算时间内完成对模拟退火算法渐进形态的逼近, 返回一个近似最优解。

结合模拟退火算法的理论分析和 X 射线超反

射镜设计的实际经验,可以认为应用模拟退火算法设计超反射镜的核心是解空间的搜索范围,搜索方式和冷却进度表的选择。解决了上述三个问题就可以大大提高模拟退火算法的效率,使算法在有效的时间内收敛到近似的全局最优解。针对宽角度 X 射线超反射镜的设计这种多维多极值的连续变量函数的优化问题,经过不断的摸索和总结,本文进行了以下两个方面的改进:

1) 在对多层膜膜层厚度分布的理解和认识的基础上,采用了更为有效的新解发生器,改进了解空间的搜索范围和搜索方式:

$$w_i^y = \begin{cases} w_i^x + r_i \times w_i^y \times d\%, & 1 \leq i \leq n, L_i \leq w_i^y \leq U_i, u_i \geq q \\ L_i + r_i \times (U_i - L_i), & 1 \leq i \leq n, u_i < q \end{cases}$$

r_i, u_i 是 $[-1, 1]$ 之间的均匀随机数,一般 q 取 0.25 可以取得较好的效果, d 可以取 5, 4, 3, 2 等。这种有效的新解发生器提高了对解空间的搜索效率,改进了最终解的质量。

2) 采用了自适应的冷却进度表^[12],提高了算法的效率,大大缩短了计算时间。

采用了这种改进的自适应的模拟退火算法来设计宽角度 X 射线超反射镜,取得了理想的设计结果,可以认为在有限的时间内找到了近似的全局最优解。评价函数的初始值 24.21,被优化后评价函数的最终输出解为 0.023,如表 2。记录下此时的各个膜层的厚度,然后计算得到这种多层膜结构的反射率,如图 3 所示。

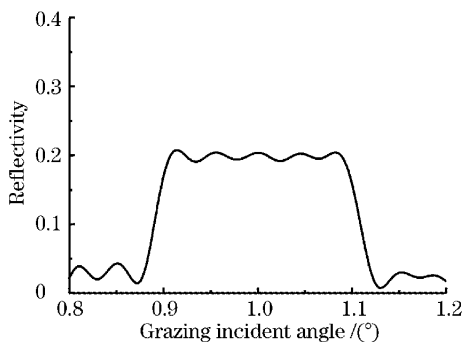


图 3 反射率与掠入射角度的曲线图

Fig. 3 Reflectivity profile versus the grazing incident angle

设计结果表明,在解决大规模连续变量的复杂问题时,精心设计的模拟退火算法可以在有限的时间内得到近似的全局最优解。模拟退火算法在离散变量的组合优化问题中的成功应用受到了普遍的关

注^[13,14]。本文对模拟退火算法在连续变量函数优化(宽角度 X 射线超反射镜的设计)中的应用进行了一定的探讨,取得了较好的设计结果,希望对模拟退火算法在实际问题中的应用有一定的帮助。

表 2 改进的自适应模拟退火算法的计算结果

Table 2 Calculation results using improved adaptive

SA algorithm			
CPU time	Average reflectivity	Final f_{MF}	Standard Deviation
4 h	0.205	0.023	0.15

4 结 论

本文将宽角度 X 射线超反射镜的设计作为连续变量全局优化问题解决的一次尝试。采用了全局优化模拟退火算法来设计宽角度 X 射线超反射镜,数值实验说明该算法是有效的、可行的,且具有较好的数值稳定性,给出了较好的 X 射线超反射镜的设计结果。在此基础上,针对宽角度 X 射线超反射镜设计模型多变量多极值而且函数复杂的特点,采用了改进的自适应模拟退火算法来设计宽角度 X 射线超反射镜,得到了理想的设计结果。设计结果表明模拟退火算法在宽角度 X 射线超反射镜设计中的应用是成功的,可以预料它在多层膜设计的其他领域也会获得应用,其自身也将不断完善,成为多层膜设计领域的又一有力工具。

参 考 文 献

- 1 V. A. Chernov, V. I. Kondratev, V. N. Korchuganov *et al.*. Synchrotron radiation and free electron laser activities at SSRC [J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 1998, **405**(2~3): 179~190
- 2 Fulvia Arfelli. Synchrotron light and imaging systems for medical radiology[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 2000, **454**(1): 11~25
- 3 Igor V. Kozhevnikov, Inna N. Bukreeva, Eric Ziegler. Design of X-ray supermirrors[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 2001, **460**(2~3): 424~443
- 4 Zhanshan Wang, Jianlin Cao, Alan G. Michette. Depth-graded multilayer X-ray optics with broad angular response[J]. *Opt. Commun.*, 2000, **177**(1): 25~32
- 5 Ke Changjun, Wang Zhanshan, Zheng Yongmei *et al.*. The design of soft X-ray broadband and flat multilayer[J]. *Optic and Precision Engineering*, 1999, **7**(3): 19~22 (in Chinese)
- 柯常军,王占山,郑咏梅等. 宽带平坦型软 X 射线多层反射膜的设计[J]. *光学精密工程*, 1999, **7**(3): 19~22
- 6 Kang Lishan, Xie Yun, You Shiyong *et al.*. *Simulated Annealing Algorithm* [M]. Beijing: Science Press, 2000. 22 (in Chinese)
- 康立山,谢云,尤矢勇等. *模拟退火算法* [M]. 北京: 科学出版社, 2000. 22
- 7 E. Louis, E. Spiller, S. Abdali *et al.*. Multilayer X-ray mirrors for the objective crystal spectrometer on the spectrum Röntgen gamma satellite[C]. *SPIE*, 1995, **2515**: 194~203

- 8 Juan I. Larruquert. New layer-by layer Multilayer design method [J]. *Opt. Soc. Am. A*, 2002, **19**(2): 385~391
- 9 Fengli Wang, Zhanshan Wang, Shuji Qin *et al.*. Investigation of ultra-short-period W/C multilayers for soft X-ray optics [J]. *Chin. Opt. Lett.*, 2005, **3**(7): 425~427
- 10 Wang Hongchang, Wang Zhanshan, Qin Shuji *et al.*. Analysis of the reflectivity of Mo/Si multilayer film for soft X-ray[J]. *Acta Optica Sinica*, 2003, **23**(11): 1360~1365 (in Chinese)
王洪昌,王占山,秦树基等. 软 X 射线 Mo/Si 多层膜反射率拟合分析[J]. 光学学报, 2003, **23**(11): 1362~1365
- 11 Zhong Zhang, Zhanshan Wang, Fengli Wang *et al.*. Design and fabrication of broad angular range depth-graded C/W multilayer mirror for hard X-ray optics[J]. *Chin. Opt. Lett.*, 2005, **3**(7): 422~424
- 12 Du Hongbin, Xue Dongfeng, Yao Pingjing. Improved adaptive simulated annealing algorithm for MINLP problems in process synthesis[J]. *J. Chemical Engineering of Chinese Universities*, 2002, **16**(1): 106~110 (in Chinese)
杜红彬,薛东峰,姚平经. 改进的自适应模拟退火算法及其在过程综合中的应用[J]. 高校化学工程学报, 2002, **16**(1): 106~110
- 13 Guanglu Gong, Yong Liu, Minping Qian. An adaptive simulated annealing algorithm [J]. *Stochastic Processes and their Applications*, 2001, **94**(2): 95~103
- 14 Patrick Wang P, Der-san Chen. Continuous optimization by a variant of simulated annealing [J]. *J. Computational Optimization and Applications*, 1996, **6**(1): 59~71

第十三届全国原子与分子物理学术会议在安徽芜湖召开

第十三届全国原子与分子物理学术会议于 4 月 16~22 日在安徽师范大学隆重举行。大会名誉主任由苟清泉教授担任,会议主任为李家明院士。本次会议由中国物理学会原子与分子物理专业委员会主办,安徽师范大学承办。

本届会议主题: 交流、友谊与创新。共有 283 名专家学者参加了本次会议,收到论文 160 多篇,主



要报道原子物理、分子物理、团簇物理、高压物理、物理力学及其他相关交叉学科的理论 and 实验研究等领域的研究进展和最新成果。

会议分大会特邀报告和分组报告两种形式进行。清华大学李家明院士、中国科技大学郭光灿院士、还有来自德国与加拿大等 26 位国内外知名专家,就原子分子及相关研究领域的最新成果、进展动态、发展方向等作了大会特邀专题报告。分组报告共设四个分会场,分别是原子结构与光谱,分子结构与光谱,原子、分子、离子、电子间的碰撞与相互作用,原子分子团簇、交叉学科,112 名专家作了分会报告。

原子与分子物理学术会议每两年举行一次,从 2007 年起,每逢奇数年召开。本次会议论文经专家评审后将由《原子与分子物理学报》以增刊形式发表,部分优秀论文将以正刊形式发表。

(张 雁)